

(添付資料)

■研究の背景

量子コンピューターや量子センサーは、量子力学的性質を利用する次世代デバイス技術として世界的に研究開発が進められています。しかしその実現には、量子状態を安定に保持できる量子材料の開発が不可欠です。

身の回りの鉄のように多数の原子が集まった固体では、電子は電子バンド（エネルギー帯）を形成するため個々の量子状態を独立して利用することはできません。しかし物質を単一原子の極限まで小さくすると、電子軌道は分裂して離散的なエネルギー準位を形成し、離散した準位（＝軌道）に存在する単一の量子スピンの直接アクセスできるようになります。この量子スピンの量子ビットとして機能します。しかしながら、単一の鉄原子を通常金属基板上に吸着させた場合、量子ビットとして安定に利用することは困難です。これは金属基盤中を流れる多数の電子が鉄原子に衝突し、そのエネルギーが伝達されることで鉄原子の磁石の方向、すなわち量子スピンの向きがある確率で反転してしまうためです。

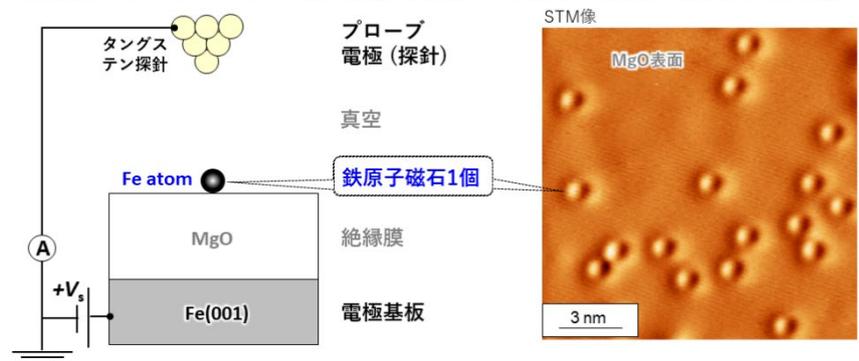
この課題に対し、金属基盤の上に酸化マグネシウム（MgO）などの極薄の電気を通さない絶縁体を挟む手法が提案されていますが、これまでの単原子吸着研究で一般的な絶縁膜の厚さ 0.2 nm（原子 1 層）または 0.4 nm（原子 2 層）では、結晶欠陥や歪みが多く生じるという問題がありました。そのため実用デバイスへの応用は、約 1 nm（原子 4 層以上）程度の厚さが望ましいと考えられていますが、技術的に困難とされていました。

■研究の成果（詳細）

本研究では、絶縁膜の厚さを約 1 ナノメートル（nm）とし、実用デバイスに近い条件で単一鉄原子が安定に吸着するかを検証しました。これまでの単原子吸着研究では、絶縁膜の厚さは 0.2 nm（原子 1 層）または 0.4 nm（原子 2 層）程度が一般的でした。しかし、このような極薄膜では結晶欠陥や歪みが多く生じます。応用の観点からは、結晶性の向上を考慮して約 1 nm（原子 4 層以上）程度の厚さが望ましいと考えられています。そこで本研究では、厚さ 1 nm の MgO 絶縁膜上に鉄原子を吸着させ、その安定性を調べました。

そもそも、物質の最小構成単位である単一原子を直接観察することは容易ではありません。本研究では、千葉大学で開発した超高真空・極低温・走査トンネル顕微鏡（STM）を用いました。単一原子を観察するためには、空気中の分子を完全に除去する必要があります。真空ポンプを用いて宇宙空間と同程度の超高真空環境を実現しました。また、単一原子は熱エネルギーによって容易に拡散するため、試料を

電氣的に“浮かんでいる”1個の鉄原子磁石の「固定」を確認—新たな量子材料へ



左図：単一の鉄原子磁石を真空および絶縁膜によって挟み込み、金属電極から電氣的に切り離すことで、鉄原子磁石の持つ量子性を保護できる。厚さが1 ナノメートルのMgO 膜表面上でも鉄原子が安定に吸着することを、走査トンネル顕微鏡（STM）を用いて確認した。右図：実験で得た MgO 絶縁膜表面上の鉄原子の STM 像。

-269°Cまで冷却して観察を行いました。図に、本研究で得た STM 像の一例を示します。MgO 絶縁膜表面上で観察される、丸い形状の粒、1つ1つが単一の鉄原子です。

絶縁膜上の単一原子を STM で観察することは非常に難しく、図の結果を得るまでに半年以上を要しました。その理由は、STM が試料の電子状態（電子軌道）を利用して観察を行うためです。MgO は絶縁体であり、電子状態が存在しないバンドギャップと呼ばれるエネルギー領域ではトンネル電子が流れないため、STM では MgO 膜自体がほとんど観察されません。言い換えれば、MgO 膜は STM では透明に近い状態として観測されます。

一方、MgO 上に吸着した鉄原子は電子軌道を持っています。しかし、単一原子では電子軌道が量子化によって分裂しているため、鉄原子の電子状態が存在する特定のエネルギー準位に電子を注入した場合にのみ STM で観測することが可能になります。しかも、そのエネルギー位置は事前には分からないため、多くの実験条件を試行する必要がありました。このように、図の STM 像は多くの条件が一致して初めて得られた結果です。

さらに理論計算との比較により、MgO 上の鉄原子は MgO の酸素原子と強く結合し、大きな電荷移動が生じていること、そして鉄原子がスピン $S = 3/2$ の量子状態を持つことが示唆されました。これにより、厚さ 1 nm の MgO 絶縁膜上であっても鉄原子は強固に吸着し、安定な量子スピン状態を保持できることが示されました。本研究は、新しい量子材料の可能性を示す重要な成果です。